

# 아미노산 잔기와 백본 간의 충돌 탐지

김구진  
경북대학교 컴퓨터학부  
e-mail : [kujinkim@gmail.com](mailto:kujinkim@gmail.com)

## Collision Detection between the Amino Acid Residue and Backbone

Ku-Jin Kim  
School of Computer Science & Engineering, Kyungpook National University

### 요약

아미노산은 단백질 분자를 구성하는 기본 단위이다. 기하학적 측면에서 원자들을 구로 대응시키면, 아미노산은 구의 집합으로 표현될 수 있다. 본 논문에서는 잔기 유연성을 가진 아미노산의 잔기를 회전하는 구의 집합으로 표현하여, 위치가 고정된 아미노산 백본과 잔기 유연성을 가진 아미노산 잔기 간의 충돌 가능성을 탐지하는 방법을 제안한다.

### 1. 서론

단백질 분자의 도킹이나 분자 간의 결합은 신약 개발 및 새로운 단백질의 합성에 있어 매우 중요한 연구 분야이다 [1-4]. 도킹이나 분자 결합에 있어 분자를 구성하는 아미노산 간의 충돌을 효율적으로 탐지하는 방법이 필요하다. 자연 상태에서의 아미노산은 허용된 범위 내에서 유연하게 형태가 변하는 현상을 보이며, 특히 백본(backbone)과 구분되는 잔기(side chain)부분은 백본에 연결된 부분을 중심으로 회전 운동을 하는 특징을 가진다.

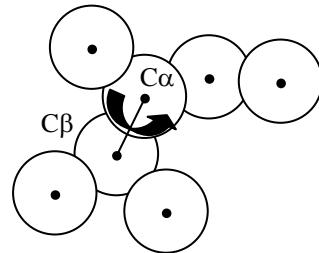
본 논문에서는 아미노산의 백본에 속한 원자들을 고정된 위치에 존재하는 구의 집합으로 가정하고, 잔기 유연성이 있는 아미노산의 잔기를 회전하는 구의 집합으로 표현하여, 백본과 잔기 간에 충돌이 일어날 가능성을 미리 탐지하는 알고리즘을 제시한다.

### 2. 잔기 유연성을 가진 아미노산의 표현

아미노산은 원자의 집합으로 구성되며, 일반적으로 기하학적인 측면에서 각 원자는 반데르바스 (van der Waals) 반경을 가진 구의 집합으로 표현된다. 한 개의 아미노산은 백본과 잔기로 구분되며, 잔기의 형태는 아미노산마다 서로 다르다. 백본은 연속적으로 교차하는 4 개의 원자로 구성되며, 잔기는 백본과 교차하는 한 개의 구 아래에 연속적으로 교차하는 구들이 구성된 형태이다 (그림 1).

아미노산에서 백본의 알파카본( $C\alpha$ )과 잔기의 베타카본( $C\beta$ )의 중심점을 연결한 선분을 회전축으로 하여 잔기가 회전한다. 아미노산에서 공유결합 관계가 있는 두 개의 원자는 기하학적으로는 교차하는 두 개의 구로 대응된다.

결합 관계가 아닌 두 개의 원자의 경우, 서로 교차하지 않는 두 개의 구에 대응된다. 서로 다른 아미노산에 존재하는 잔기들 간에는 공유 결합이 없다고 가정



(그림 1) 잔기 유연성을 가진 아미노산

할 수 있고, 이것은 즉, 서로 다른 아미노산에 속한 잔기를 나타내는 구들 간에는 교차가 없다는 가정이 된다. 따라서, 잔기 유연성을 가진 단백질 분자를 표현하기 위해서는, 각각 회전하는 두 개의 잔기가 어떤 경우에 서로 충돌을 하게 되는지를 탐지하는 방법이 필요하다.

잔기 유연성을 가진 아미노산에서는 백본에 결합된 잔기가 강체 운동을 한다고 가정할 수 있다. 본 논문에서는 잔기 내에 속한 원자들 간에는 상대적인 위치가 변하지 않고, 백본과 결합된 잔기는 한 개의 강체로서 잔기 내의 모든 원자가 동일하게 백본에 대해 상대적으로 회전운동을 한다고 가정한다. 이러한 가정 하에서, 한 아미노산 내에서 회전운동을 하는 잔기가 다른 아미노산의 백본과 충돌할 가능성이 있는지를 미리 판단하는 방법을 제안한다.

### 3. 백본과 잔기 간의 충돌 탐지

두개의 아미노산  $X, Y$ 가 주어졌다고 가정하자.  $S(c, r)$ 은 중심점  $c$  와 반경  $r$  을 갖는 구를 나타낸다고 가정하면, 아미노산  $X$  의 백본에 속한 원자들은 다음과 같은 구의 집합으로 표시된다.

$A = \{ S(Ac_i, Ar_i) \mid 1 \leq i \leq 4 \}$ ,  
아미노산  $Y$  의 잔기에 속한 원자들은 다음과 같이 표시된다.

$B = \{ S(Bc_j, Br_j) \mid 1 \leq j \leq n \}$ ,  
여기에서  $n$  은 아미노산  $Y$  의 잔기에 속한 원자의 갯수이다.

아미노산  $X$  의 백본과  $Y$  의 잔기 간의 충돌을 탐지하는 알고리즘은 다음과 같다.

1) 3 차원 공간 상에서 아미노산  $Y$ 의 알파카본 중심점이 원점에 놓이고, 베타카본이  $z$  축 상에서 양의 방향에 놓이도록 변환 행렬  $M$  을 구성한다.

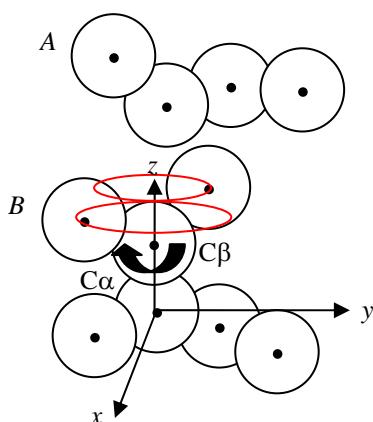
2) 변환행렬  $M$  을  $A$  와  $B$  에 함께 적용하여, 다음과 같이  $A, B$  를 변환한다 (그림 2).

$$\begin{aligned} A &= MA \\ B &= MB \end{aligned}$$

3)  $B$  의 잔기에 속한 원자의 중심점의 위치가  $p = (p_x, p_y, p_z)$  라 할 때,  $c$  의 회전 운동은 다음 식으로 표현된다.

$$(p_x + R \cos s, p_y + R \sin s, p_z),$$

여기에서  $R = (p_x^2 + p_y^2)^{1/2}$  이다. 점  $p$  가 회전이동한 궤적은 점  $(0, 0, p_z)$  을 지나고 법선벡터가  $(0, 0, 1)$ 인 평면 상에서 정의되는 중심점  $(0, 0, p_z)$  와 반경  $R$  을 가진 원으로 표시할 수 있다.



(그림 2) 잔기  $B$ 와 백본  $A$ 의 변환

4)  $B$  에 속한 원자들이 회전운동을 하며  $A$  의 원자들과 충돌할 가능성이 있는지 판단하기 위해 다음 과정을 수행한다.

```

for each  $B_j \in B$  do begin
   $p = Bc_j$ ;
   $R = (p_x^2 + p_y^2)^{1/2}$ ;
  for  $i = 1$  to 4 do begin
    if  $C(p, R) \cap S(Ac_i, Ar_i + Br_j) \neq \emptyset$  then begin
      Decide that  $A$  and  $B$  will have collisions when  $B$ 
      rotates;
      exit;
    end;
  end;

```

Decide that  $A$  and  $B$  will not collide each other even if  $B$  rotates;

여기에서  $C(p, R)$  은 중심점이  $p$  이고 반경이  $R$  인 원으로서, 원을 포함하는 평면의 법선 벡터가  $(0, 0, 1)$  이라고 가정한다.

#### 4. 결론

본 논문에서는 유연성이 있는 잔기와 고정된 위치의 백본에 속한 원자들 간에 충돌 가능성 있는지를 판단하는 알고리즘을 제시하였다.

#### 감사의 글

이 논문은 2013년도 정부(교육부)의 재원으로 한국연구재단의 기초연구사업 지원을 받아 수행된 것임(NRF-2013R1A1A2A10004391).

#### 참고문헌

- [1] L. David, F. Michael, H. Philip, R. Gregory, W. Brian, S. Fred, Stalk: an interactive system for virtual molecular docking, IEEE Computational Science and Engineering 4 (2) (1997) 55-65.
- [2] J. A. E. Todd, M. A. Shingo, S. Geoffrey, D. K. Irwin, Dock4.0: Search strategies for automated molecular docking of flexible molecule databases, Journal of Computer-Aided Molecular Design 15 (5) (2001) 411-428.
- [3] N. Hiroshi, M. Hiroshi, T. Hiroshi, Concept and prototype of protein-ligand docking simulator with force feedback technology, Bioinformatics 18 (1) (2002) 140-146.
- [4] R. D. Taylor, P. J. Jewsbury, J. W. Essex, A review of protein-small molecule docking methods, Journal of Computer-Aided Molecular Design 16 (3) (2002) 151-166.